

QCforeverによる量子化学シミュレーション自動化

横浜市立大学 生命医科学研究科 氏名 寺山 慧

目的 有機分子の物性が計算で推定できれば、材料開発から創薬まで様々な分野で応用が期待される。量子化学計算による物性計算の自動化とその評価を目標とした。

内容 光物性・電子物性を含む様々な自動計算を可能にするため、量子化学計算を自動化する手法QCforeverの拡張に取り組んだ。特に、円偏光・蛍光円偏光、分極率に関する手法開発を重点的に行った。

結果 QCforeverの実装を行い、数万分子の分子物性の評価・検証を実施した。

利用した計算機

SQUID 汎用CPUノード群

ノード時間 約10万NH

